數學傳播　49卷3期, pp. 120-130

强連通圖中封閉道路的邊數期望值

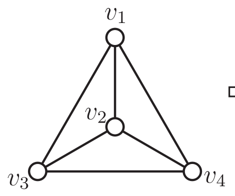
曹爾秦 · 楊宗穎

壹、前言

考慮一個正四面體, 頂點分別爲 v_1, v_2, v_3, v_4, 若一隻螞蟻由 v_1 出發, 在機率均等的原則下, 每次皆以 $\dfrac{1}{3}$ 的機率選擇下一條邊行走到相鄰的點, 過程中點與邊都可以重複, 直到第一次走回 v_1 後即停止。整個過程, 若螞蟻走了 k 條邊, 則共有 $3\times 2^{k-2}$ 種走法, 而每一種走法發生的機率爲 $\left(\dfrac{1}{3}\right)^k$, 透過無窮級數的處理技巧, 可知螞蟻行走邊數的期望值爲

$$\sum_{k=2}^{\infty} k\left(\frac{1}{3}\right)^k \times (3\times 2^{k-2}) = \frac{1}{3}\sum_{k=2}^{\infty} k\left(\frac{2}{3}\right)^{k-2} = 4,$$

意即螞蟻要走回出發點平均要走 4 條邊。



v_1 爲出發點

邊數	2	3	$\cdots$	k	$\cdots$
機率	$\left(\frac{1}{3}\right)^2\times 3$	$\left(\frac{1}{3}\right)^3\times 3\times 2$	$\cdots$	$\left(\frac{1}{3}\right)^k\times 3\times 2^{k-2}$	$\cdots$

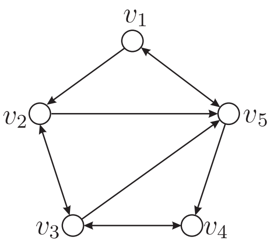
期望值 $=4$

本文將上述的問題一般化, 用圖論的語言來重新詮釋這樣的邊數期望值問題, 研究的對象爲具有強連通性的有向圖, 螞蟻必須遵循有向邊的方向性來進行隨機漫步, 而從一個點選擇哪一條有向邊來行走的機率則是以函數來決定 (不限制機率均等), 再利用線性代數的觀點刻畫封閉道路的邊數期望值, 並試著探討與圖形結構之關係。

貳、基本知識與符號

一個圖 G 是由點集合 $V(G)$ 與邊集合 $E(G)$ 構成, 令 $V(G)=\{v_1, v_2, \ldots, v_n\}$, 若 G 的每一條邊都具有方向性, 則稱爲『有向圖 (*directed graph*)』。若 v_i 與 v_j 有邊相連且爲 v_i 指向 v_j, 則將此有向邊記爲序對『(v_i, v_j)』。本文所討論的有向圖, 對於任意相連的兩點 v_i 與 v_j, 有向邊 (v_i, v_j) 與 (v_j, v_i) 是可以同時存在的 (在圖示上使用雙向箭頭來表示這兩

條有向邊)。考慮 $v \in V(G)$, 令 v 的『*外鄰居* (*out-neighbor*)』爲存在有向邊由 v 指向的點所形成的集合, 以符號記爲『$N^+(v)$』; 令 v 的『*內鄰居* (*in-neighbor*)』爲存在有向邊指向 v 的點所形成的集合, 以符號記爲『$N^-(v)$』。換句話說 $N^+(v) = \{u : (v,u) \in E(G)\}$ 與 $N^-(v) = \{u : (u,v) \in E(G)\}$。此外, $|N^+(v)|$ 與$|N^-(v)|$ 分別稱爲點 v 的『*外度數* (*out-degree*)』與『*內度數* (*in-degree*)』, 符號依序記爲『$d^+(v)$』與『$d^-(v)$ 』。



$$|V(G)| = 5 \qquad N^+(v_5) = \{v_1, v_4\} \qquad d^+(v_5) = 2$$
$$|E(G)| = 10 \qquad N^-(v_5) = \{v_1, v_2, v_3\} \qquad d^-(v_5) = 3$$

對於有向圖 G, 若任意兩點 v_i 與 v_j, 皆存在一系列的有向邊使得 v_i 能行走到 v_j, 則稱此有向圖爲『*強連通圖* (*strongly connected graph*)』, 本文所討論的圖 G 皆爲強連通圖。強連通圖的結構, 能保證螞蟻在出發後, 依循有向邊來進行隨機漫步, 不會有無法走回出發點的狀況。

因爲螞蟻行走的方式, 是完全依循有向邊的存在與否, 進行下一步的選擇, 假設螞蟻從一個點選擇哪一條邊直接行走到外鄰居時, 皆有固定的選邊機率。對 $(v_i, v_j) \in E(G)$, 定義 v_i 直接走到 v_j 的選邊機率爲『$P(i.j)$』, 其中函數 P 滿足 $0 < P(i,j) \leq 1$ 且 $\sum\limits_{v_j \in N^+(v_i)} P(i,j) = 1$。

若 v_i 與 v_j 爲圖形上的任意點, 考慮由 v_i 出發第一次走到 v_j 所產生的道路, 將此道路的邊數期望值記爲『$E(i \to j)$』。特別的, 將 $E(i \to i)$ 的值記爲『$E(i)$』。圖 G 的點集合預設爲 $V(G) = \{v_1, v_2, \ldots, v_n\}$, 因此 $\{E(i \to j) : 1 \leq i,j \leq n\}$ 共有 n^2 個期望值, 我們想要探討的是對任意 $v_i \in V(G)$, $E(i)$ 的值關於圖 G 與函數 P 是否有特殊關聯性。

參、期望值 $E(i \to j)$ 的線性關係

考慮由 v_i 出發行走一條邊抵達外鄰居 v_k 後 (其中 $v_k \neq v_j$), 再考慮由 v_k 繼續行走, 第一次抵達 v_j 所經過的邊數期望值, 則可以建立 $E(i \to j)$ 的線性關係式, 故有以下引理。

引理 1: 對任意 v_i 與 v_j, 則 $E(i \to j) = 1 + \sum\limits_{\substack{v_k \in N^+(v_i) \\ v_k \neq v_j}} P(i,k) \cdot E(k \to j)$。

證明: 若 $v_j \in N^+(v_i)$, 由於 v_i 有 $P(i,j)$ 的機率走一條邊即可走到 v_j, 也有 $P(i,k)$ 的機率走到 $v_k \in N^+(v_i) \backslash \{v_j\}$, 而 v_k 後續要第一次走到 v_j 的邊數期望值爲 $E(k \to j)$, 故 $E(i \to j) = P(i,j) \times 1 + \sum\limits_{\substack{v_k \in N^+(v_i) \\ v_k \neq v_j}} P(i,k)\big(E(k \to j) + 1\big) = \sum\limits_{v_k \in N^+(v_i)} P(i,k) +$

$\displaystyle\sum_{\substack{v_k\in N^+(v_i)\\ v_k\neq v_j}} P(i,k)\cdot E(k\to j)$, 整理後可得 $E(i\to j)=1+\displaystyle\sum_{\substack{v_k\in N^+(v_i)\\ v_k\neq v_j}} P(i,k)\cdot E(k\to j)$。同理, 若 $v_j\notin N^+(v_i)$, 則 $E(i\to j)=\displaystyle\sum_{\substack{v_k\in N^+(v_i)\\ v_k\neq v_j}} P(i,k)\big(E(k\to j)+1\big)=\displaystyle\sum_{v_k\in N^+(v_i)} P(i,k)+\displaystyle\sum_{\substack{v_k\in N^+(v_i)\\ v_k\neq v_j}} P(i,k)\cdot E(k\to j)$, 亦可得知 $E(i\to j)=1+\displaystyle\sum_{\substack{v_k\in N^+(v_i)\\ v_k\neq v_j}} P(i,k)\cdot E(k\to j)$。 □

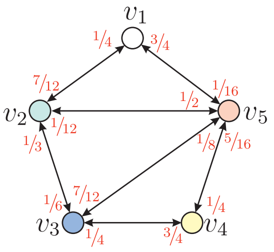
讓我們用一個例子來說明如何透過引理1來求得邊數期望值 $E(1)$。

例 1: 給定圖 G, 如下圖所示, 其中頂點周圍的數字代表該點走到其外鄰居的機率, 函數 P 定義爲:

$$\begin{cases} P(1,2)=\frac{1}{4}\\ P(1,5)=\frac{3}{4}\end{cases},\ \begin{cases} P(2,1)=\frac{7}{12}\\ P(2,3)=\frac{1}{3}\\ P(2,5)=\frac{1}{12}\end{cases},\ \begin{cases} P(3,2)=\frac{1}{6}\\ P(3,4)=\frac{1}{4}\\ P(3,5)=\frac{7}{12}\end{cases},\ \begin{cases} P(4,3)=\frac{3}{4}\\ P(4,5)=\frac{1}{4}\end{cases},\ \begin{cases} P(5,1)=\frac{1}{16}\\ P(5,2)=\frac{1}{2}\\ P(5,3)=\frac{1}{8}\\ P(5,4)=\frac{5}{16}\end{cases}.$$

考慮 $j=1$, 利用引理 1 則可建立出五條關係式如下:

$$\begin{cases} E(1\to1)=1+\frac{1}{4}E(2\to1)+\frac{3}{4}E(5\to1)\\ E(2\to1)=1+\frac{1}{3}E(3\to1)+\frac{1}{12}E(5\to1)\\ E(3\to1)=1+\frac{1}{6}E(2\to1)+\frac{1}{4}E(4\to1)+\frac{7}{12}E(5\to1)\\ E(4\to1)=1+\frac{3}{4}E(3\to1)+\frac{1}{4}E(5\to1)\\ E(5\to1)=1+\frac{1}{2}E(2\to1)+\frac{1}{8}E(3\to1)+\frac{5}{16}E(4\to1)\end{cases}.$$



將上述關係式視爲聯立方程組, 則可利用克拉瑪公式求得每一個期望值。特別的, 當我們將每一條 $E(i\to1)$ 的關係式乘上 v_i 的外度數 $d^+(v_i)$ 時, 則聯立方程組可改寫如下:

被抵銷

$$\begin{cases} 2E(1\to1)=2\big(1+\frac{1}{4}E(2\to1)+\frac{3}{4}E(5\to1)\big)\\ 3E(2\to1)=3\big(1+\frac{1}{3}E(3\to1)+\frac{1}{12}E(5\to1)\big)\\ 3E(3\to1)=3\big(1+\frac{1}{6}E(2\to1)+\frac{1}{4}E(4\to1)+\frac{7}{12}E(5\to1)\big)\\ 2E(4\to1)=2\big(1+\frac{3}{4}E(3\to1)+\frac{1}{4}E(5\to1)\big)\\ 4E(5\to1)=4\big(1+\frac{1}{2}E(2\to1)+\frac{1}{8}E(3\to1)+\frac{5}{16}E(4\to1)\big)\end{cases}$$

5 式相加

$$\underbrace{2E(1\to1)}_{\text{左式}}=\underbrace{14}_{\text{外度數總和}}\ \Longrightarrow\ E(1\to1)=E(1)=7$$

可以發現, 將 5 式相加之後, 除了 $E(1 \to 1)$ 以外, 其餘的變數都會被抵銷掉, 因此可以求得 $E(1 \to 1) = E(1) = 7$。事實上, 對於這個例子, 利用一樣的手法, 也能夠求得 $E(2)$、$E(3)$、$E(4)$ 與 $E(5)$ 的值依序爲 $\frac{14}{3}$、$\frac{14}{3}$、7 與 $\frac{7}{2}$。因爲外度數總和即爲圖的邊數, 因此這五個期望值皆可表示爲『圖的邊數』與『該點外度數』的比值, 也就是對任意 $v_i \in V(G)$, $E(i) = \dfrac{\sum\limits_{v \in V(G)} d^+(v)}{d^+(v_i)} = \dfrac{|E(G)|}{d^+(v_i)}$ 。 □

例 1 能有這樣巧妙的結論取決於圖 G 的結構與函數 P 的設定, 其關鍵原因在於對任意 $v_i \in V(G)$, 關係式 $\sum\limits_{v_k \in N^-(v_i)} d^+(v_k) \cdot P(k,i) = d^+(v_i)$ 恆成立。有關這樣的性質, 我們試著將結論一般化, 並嘗試刻畫出期望值的通式。

肆、方程組係數的分析

對於一個 n 個點的圖 G 與邊的機率函數 P, 考慮一個正實數數列 $\langle a_i \rangle_{i=1}^n$, 設計特殊向量如下:

1. 定義 $\vec{\alpha} \in \mathbb{R}^n$, 其中第 j 個分量爲 $\sum\limits_{v_k \in N^-(v_j)} a_k \cdot P(k,j) - a_j$;
2. 對任意 $i \in \{1, 2, \ldots, n\}$, 定義 $\vec{e_i} \in \mathbb{R}^n$, 其中第 j 個分量爲 $e_{ji} = \begin{cases} E(j \to i), & \text{當 } j \neq i \\ 0, & \text{當 } j = i \end{cases}$。

利用這兩個特殊向量的符號, 我們可以將 $E(i)$ 表示成向量內積相關的型態, 故有以下引理。

引理 2: 令 G 爲強連通圖, 則對任意 $v_i \in V(G)$, $a_i \cdot E(i) = \sum\limits_{k=1}^n a_k + \vec{\alpha} \cdot \vec{e_i}$ 恆成立。

證明: 根據引理 1 可知 $E(k \to i) = 1 + \sum\limits_{\substack{v_j \in N^+(v_k) \\ v_j \neq v_i}} P(k,j) \cdot E(j \to i)$, 其中 $k = 1, 2, \ldots, n$。

對任意 $k \in \{1, 2, \ldots, n\}$, 將 $E(k \to i)$ 的線性關係式乘上 a_k, 則可得關係式 $a_k \cdot E(k \to i) = a_k + \sum\limits_{\substack{v_j \in N^+(v_k) \\ v_j \neq v_i}} a_k \cdot P(k,j) \cdot E(j \to i)$。將此 n 條線性關係直接相加, 讓左式總和只保留變數 $a_i \cdot E(i \to i)$, 其餘變數都移項到右式, 整理後爲

$$\sum_{k=1}^n a_k + \sum_{v_j \in V(G) \setminus \{v_i\}} \Big(\sum_{v_k \in N^-(v_j)} a_k \cdot P(k,j) - a_j \Big) \cdot E(j \to i) = \sum_{k=1}^n a_k + \vec{\alpha} \cdot \vec{e_i}.$$

由此可得 $a_i \cdot E(i \to i) = a_i \cdot E(i) = \sum\limits_{k=1}^n a_k + \vec{\alpha} \cdot \vec{e_i}$。 □

令 G 爲強連通圖, 考慮函數 P 與正實數數列 $\langle a_i\rangle_{i=1}^n$, 運用引理 2, 則有以下定理。

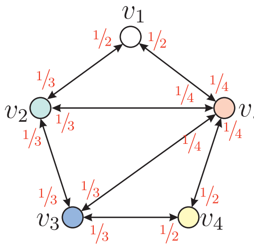
定理 1: 若對任意 $v_i\in V(G)$, $\displaystyle\sum_{v_k\in N^-(v_i)} a_k\cdot P(k,i)=a_i$, 則對任意 $v_i\in V(G)$, $E(i)=\dfrac{\sum_{k=1}^n a_k}{a_i}$。

證明: 因爲對任意 $v_i\in V(G)$, 皆滿足 $\displaystyle\sum_{v_k\in N^-(v_i)} a_k\cdot P(k,i)=a_i$, 所以特殊向量 $\vec{\alpha}=\vec{0}$, 故 $\vec{\alpha}\cdot\vec{e_i}=0$。根據引理 2 的結論可知對任意 $v_i\in V(G)$, 關係式 $a_i\cdot E(i)=\sum_{k=1}^n a_k$ 恆成立, 由此可知 $E(i)=\dfrac{\sum_{k=1}^n a_k}{a_i}$。 □

透過討論方程組的係數, 定理 1 的結論說明了, 對於函數 P 而言, 只要能夠找到滿足條件的正實數數列 $\langle a_i\rangle_{i=1}^n$, 即可得知每一點的期望值 $E(i)$。

例 2: 考慮例 1 中的圖 G, 其中對任意 $(v_i,v_j)\in E(G)$, 若函數 P 的值設定爲 $P(i,j)=\dfrac{1}{d^+(v_i)}$, 則正實數數列 $(a_1,a_2,a_3,a_4,a_5)=\big(d^+(v_1),d^+(v_2),d^+(v_3),d^+(v_4),d^+(v_5)\big)$, 滿足對任意 $v_i\in V(G)$, $\displaystyle\sum_{v_k\in N^-(v_i)} a_k\cdot P(k,i)=\sum_{v_k\in N^-(v_i)} d^+(v_k)\cdot\frac{1}{d^+(v_k)}=d^-(v_i)=d^+(v_i)=a_i$。

由定理 1 的結論可知, 對任意 $v_i\in V(G)$, 期望值 $E(i)=\dfrac{\sum_{k=1}^n a_k}{a_i}=\dfrac{\sum_{k=1}^n d^+(v_k)}{d^+(v_i)}=\dfrac{|E(G)|}{d^+(v_i)}$。



$\Rightarrow$ 存在正實數數列 $(2,3,3,2,4)$ $\Rightarrow$ $E(1)=E(4)=\frac{14}{2}$, $E(2)=E(3)=\frac{14}{3}$, $E(5)=\frac{14}{4}$ $\Rightarrow$ $\forall v_i\in V(G)$ $E(i)=\frac{|E(G)|}{d^+(v_i)}$

□

例 2 中函數 P 的設定, 是每個點都以機率均等的原則, 選擇有向邊來進行隨機漫步, 在這種特殊的情況下, 符合定理 1 的正實數數列 $\langle a_i\rangle_{i=1}^n$ 即爲各點所決定的外度數數列 $\langle d^+(v_i)\rangle_{i=1}^n$, 因此各點的期望值可由圖 G 的結構來直接刻畫, 故例 2 可推廣爲以下推論。

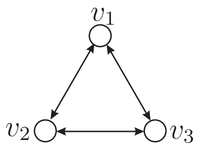
推論: 若對任意 $v_i\in V(G)$, $d^-(v_i)=d^+(v_i)$ 且對任意 $(v_i,v_j)\in E(G)$, $P(i,j)=\dfrac{1}{d^+(v_i)}$, 則對任意 $v_i\in V(G)$, 期望值 $E(i)=\dfrac{|E(G)|}{d^+(v_i)}$。

因爲當圖 G 與函數 P 確定之後, 各點的期望值都隨之確定, 所以我們想要探討的是, 符

合定理 1 的正實數數列 $\langle a_i \rangle_{i=1}^n$ 是否必然存在呢? 後續我們將利用矩陣來說明其存在性, 意味著可以由數列 $\langle a_i \rangle_{i=1}^n$ 來決定各點的期望值。至於例 1 與例 2, 爲何針對不同的函數 P, 每個點 v_i 的期望值皆可表示爲 $E(i) = \dfrac{|E(G)|}{d^+(v_i)}$? 後續也將解釋其主要原因。

伍、矩陣觀點的分析

接下來我們試著用矩陣的觀點來表示期望值的線性關係。對於 n 個點的圖 G, 根據引理 1 共可以建立出 n^2 條關係式, 這些關係式透過轉移矩陣, 可以統一使用矩陣的乘法來表達。以下我們用三個點的圖來說明, 考慮圖 G (如下圖所示), 共可以建立 9 條關係式如下:



當 v_1 爲終點時, 則 $\begin{cases} E(1\to 1)=1+P(1,2)E(2\to 1)+P(1,3)E(3\to 1) \\ E(2\to 1)=1+P(2,3)E(3\to 1) \\ E(3\to 1)=1+P(3,2)E(2\to 1) \end{cases}$;

當 v_2 爲終點時, 則 $\begin{cases} E(1\to 2)=1+P(1,3)E(3\to 2) \\ E(2\to 2)=1+P(2,1)E(1\to 2)+P(2,3)E(3\to 2) \\ E(3\to 2)=1+P(3,1)E(1\to 2) \end{cases}$;

當 v_3 爲終點時, 則 $\begin{cases} E(1\to 3)=1+P(1,2)E(2\to 3) \\ E(2\to 3)=1+P(2,1)E(1\to 3) \\ E(3\to 3)=1+P(3,1)E(1\to 3)+P(3,2)E(2\to 3) \end{cases}$。

適當地移項後則可將 9 條關係式表示爲以下的矩陣乘法 $H(M-I)=D-J$:

$$\underbrace{\begin{bmatrix} 0 & E(2\to 1) & E(3\to 1) \\ E(1\to 2) & 0 & E(3\to 2) \\ E(1\to 3) & E(2\to 3) & 0 \end{bmatrix}}_{H} \underbrace{\begin{bmatrix} -1 & P(2,1) & P(3,1) \\ P(1,2) & -1 & P(3,2) \\ P(1,3) & P(2,3) & -1 \end{bmatrix}}_{M-I} = \underbrace{\begin{bmatrix} E(1)-1 & -1 & -1 \\ -1 & E(2)-1 & -1 \\ -1 & -1 & E(3)-1 \end{bmatrix}}_{D-J}$$

以下解釋矩陣 H、M、D 與 J 的定義。

事實上, 給定圖 G, 其中 $V(G)=\{v_1,v_2,\ldots,v_n\}$, 選邊機率爲函數 P, 上述的矩陣關係式具有一般性, 以下定義矩陣:

1. $H=[h_{i,j}]$ 是由 $\vec{e_1},\vec{e_2},\ldots,\vec{e_n}$ 決定的矩陣, 其中 $h_{i,j}=\begin{cases} E(j\to i)\,, & \text{當 } i\neq j \\ 0\,, & \text{當 } i=j \end{cases}$。

2. $M=[m_{i,j}]$ 爲函數 P 決定的轉移矩陣, 其中 $m_{i,j}=\begin{cases} P(j,i)\,, & \text{當 } (v_j,v_i)\in E(G) \\ 0\,, & \text{當 } (v_j,v_i)\notin E(G) \end{cases}$。

3. $D=[d_{i,j}]$ 爲期望值 $E(i)$, $i=1,2,\ldots,n$ 決定的對角矩陣, 其中 $d_{i,j}=\begin{cases} E(i)\ , 當\ i=j \\ 0\ \ , 當\ i\neq j \end{cases}$。

4. I 爲 n 階單位方陣, J 爲元素全爲 1 的 n 階全一方陣。

利用上述矩陣的概念, 則可得以下引理。

引理 3 (**矩陣關係式**): 令 G 爲強連通圖, 選邊機率爲函數 P, 則 $H(M-I)=D-J$。

若 n 階方陣滿足每一行與每一列皆恰有一個 1 且其餘元素皆爲 0, 則將此方陣稱爲『排列矩陣』。例如所有的二階排列矩陣爲 $\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$ 與 $\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$; 所有的三階排列矩陣爲

$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$、$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}$、$\begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$、$\begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}$、$\begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix}$ 與 $\begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix}$。

對於一個 n 階方陣 A, 若存在一個 n 階排列矩陣 X 與其轉置矩陣 X^T 能使得 $X^TAX=\begin{bmatrix} B & C \\ O & F \end{bmatrix}$, 則稱 A 爲『可分解 (*reducible*)』, 其中 B 爲 r 階方陣 $(1\leq r\leq n-1)$、F 爲 $n-r$ 階方陣、C 爲 $r\times(n-r)$ 階矩陣且 O 爲 $(n-r)\times r$ 階零矩陣。若 A 不爲可分解的方陣, 則稱爲『 不可分解 (*irreducible*)』。

例 3: 令 $A_1=\begin{bmatrix} 4 & 6 & 2 \\ 0 & 7 & 0 \\ 2 & 3 & 1 \end{bmatrix}$, 則排列矩陣 $X=\begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix}$ 能使得 $X^TA_1X=\begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 4 & 6 \\ 0 & 0 & 9 \end{bmatrix}$, 故 A_1 爲可分解。令 $A_2=\begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 4 & 6 \\ 3 & 6 & 0 \end{bmatrix}$, 則不存在排列矩陣 X 使得 $X^TA_2X=\begin{bmatrix} B & C \\ O & F \end{bmatrix}$, 故 A_2爲不可分解。 □

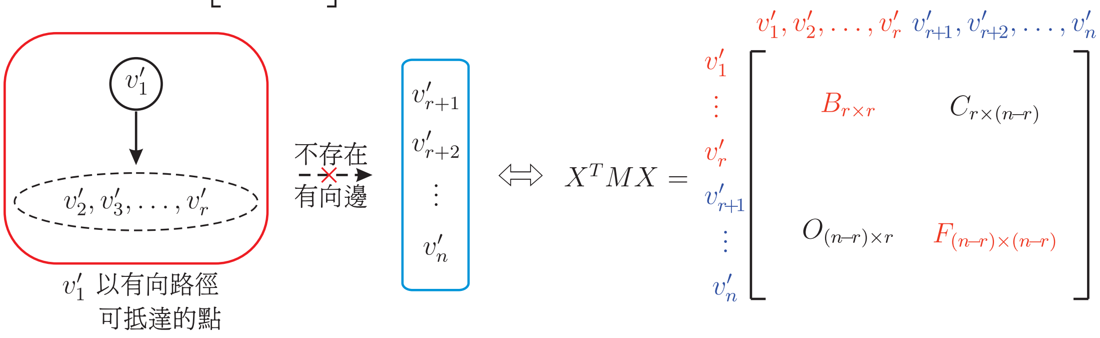
一個轉移矩陣若爲不可分解, 就表示不存在一種狀態的重新排序, 使得各種狀態轉移的機率, 可被重新表現爲左下方是一個零矩陣 $O_{(n-r)\times r}$ 的轉移矩陣, 其中 $1\leq r\leq n-1$。有關圖 G 與函數 P 所決定的轉移矩陣 M, 透過 M 中的各非零元素, 可以直接呈現圖 G 的有向邊結構。然而一個不可分解的轉移矩陣 M, 即能反映出圖 G 爲強連通圖, 反之亦然, 故有以下引理。

引理 4: G 爲強連通圖若且唯若轉移矩陣 M 爲不可分解。

證明: $(\Rightarrow)$ 假設 M 爲可分解, 則存在排列矩陣 X 使得 $X^TMX=\begin{bmatrix} B & C \\ O & F \end{bmatrix}$, 其中 O 爲

$(n-r)\times r$ 階零矩陣。因此對任意 $1\le i\le r$ 與任意 $r+1\le j\le n$, $(v'_i, v'_j)\notin E(G)$。此與 G 爲強連通圖矛盾。

($\Leftarrow$) 假設 G 非強連通圖, 不失一般性, 設 v_1 所能連通的點所形成的集合爲 $\{v_2, v_3, \ldots, v_r\}$, 則不存在有向邊從 $\{v_1, v_2, \ldots, v_r\}$ 指向 $\{v_{r+1}, v_{r+2}, \ldots, v_n\}$, 因此 $I^TMI = M = \begin{bmatrix} B & C \\ O & F \end{bmatrix}$, 其中 O 爲 $(n-r)\times r$ 階零矩陣。此與 M 爲不可分解矛盾。



□

若一個方陣的各項元素皆爲非負, 則稱此矩陣爲非負方陣。Perron-Frobenius Theorem 提供了許多有關非負方陣的性質, 若 A 爲非負方陣, 則有以下四點性質:

性質 1: 有一個實數特徵值 ρ, 且其它特徵值 λ 都滿足 $|\lambda|\le\rho$, 其中 ρ 稱爲譜半徑。

性質 2: 若 A 爲不可分解, 則特徵值 ρ 對應的特徵向量有一個是各項分量全爲正數。

性質 3: 如果某個特徵向量各項分量全爲正數, 則它對應的特徵值必爲 ρ。

性質 4: 若 A 不可分解, 則 ρ 的代數重數及幾何重數都是 1。

因爲轉移矩陣 M 爲非負方陣且滿足 $[1,1,\ldots,1]M = [1,1,\ldots,1]$, 所以 $M^T\begin{bmatrix}1\\1\\\vdots\\1\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}1\\1\\\vdots\\1\end{bmatrix}$。這表示非負方陣 M^T 存在特徵值爲 1 且存在各項分量都是正數的特徵向量, 根據性質 3, 可知 M^T 的譜半徑 $\rho=1$。因爲 $\det(x\cdot I-M) = \det(x\cdot I-M)^T = \det(x\cdot I^T-M^T) = \det(x\cdot I-M^T)$, 所以 M 與 M^T 有一樣的特徵多項式, 因此具有完全相同的特徵值, 即 M 亦有譜半徑 $\rho=1$。因爲 M 是不可分解, 根據性質 2, 可知存在特徵值爲 $\rho=1$ 的特徵向量 $\vec{u}=[u_1,u_2,\ldots,u_n]>0$, 其各項分量全爲正數。意即 M 存在穩定狀態機率分布 $S = \dfrac{1}{\sum_{i=1}^{n} u_i}[u_1,u_2,\ldots,u_n] = [p_1,p_2,\ldots,p_n]>0$, 使得 $MS^T = S^T$。因爲 M 是不可分解, 根據性質 4, 可知穩定狀態機率分布 $S=[p_1,p_2,\ldots,p_n]>0$ 是唯一的。

利用引理 3 的結論, 所有期望值的線性關係可用矩陣表示爲 $H(M-I)=D-J$。因爲非負矩陣 M 爲強連通圖的轉移矩陣, 根據 Perron-Frobenius Theorem 可知轉移矩陣 M 有唯一的穩定狀態機率分布 $S>0$, 將穩定狀態 S 記爲列矩陣 $S=[p_1,p_2,\ldots,p_n]$, 其中元素 p_i 皆爲正數。定義 $R=(r_{i,j})=\begin{bmatrix} p_1^{-1} & & & & \\ & p_2^{-1} & & 0 & \\ & & \ddots & & \\ & 0 & & \ddots & \\ & & & & p_n^{-1}\end{bmatrix}$, 是由穩定狀態的各項機率的倒數所決定的 n 階方陣。探討矩陣關係式與穩定狀態 S 的關係, 我們可以發現, 期望值 $E(i)$ 與機率 p_i 有密切關係, 故有以下定理。

定理 2: 令 $S=[p_1,p_2,\ldots,p_n]>0$ 爲 M 的穩定狀態機率分布, 則對任意 $v_i\in V(G)$, $E(i)=\dfrac{1}{p_i}$。

證明: 因爲 $MS^T=S^T$, 所以 $(M-I)S^T=O_{n\times 1}$ 爲零行矩陣, 所以 $H(M-I)S^T=(D-J)S^T=O_{n\times 1}$ 亦爲零行矩陣。令 $d_i=d_{i,i}=E(i)$, 考慮 $D-J$ 的第 i 列與 S^T 的乘積, 可得 $d_ip_i-(p_1+p_2+\cdots+p_n)=0$, 整理後得 $d_ip_i=1$, 故 $d_i=\dfrac{1}{p_i}$。由此可知對任意 $v_i\in V(G)$, $E(i)=d_i=\dfrac{1}{p_i}$。 □

定理 2 說明了各點的期望值 $E(i)$ 是由轉移矩陣 M 的穩定狀態機率分布 S 所決定, 而 Perron-Frobenius Theorem 可保證這個穩定狀態機率分布是恆正、存在且唯一的。然而定理 2 的結論也可以有另一種直觀的解釋, 穩定狀態的機率分布說明著從 v_1 出發, 長期下來會有 p_1 的機率抵達 v_1, 會有 $1-p_1$ 的機率抵達其他點, 因此可以將整個行走過程整合成一個伯努利試驗 (Bernoulli trial), 當抵達 v_1 時即視爲成功, 其成功機率爲 p_1。令隨機變數 X 表示第一次成功所試驗的次數, 則 X 的機率分布即爲參數 p_1 的幾何分布 $X\sim G(p_1)$。因爲幾何分布 X 的期望值公式爲成功機率 p_1 的倒數, 所以 $E(X)=\dfrac{1}{p_1}$, 變異數 $\operatorname{Var}(X)=\dfrac{1-p_1}{p_1^2}$, 而第一次成功所需要試驗的次數即可視爲螞蟻行走的邊數, 這樣的觀點可以作爲定理 2 所展現的直觀意義。

當我們比較定理 1 與定理 2 的關係可以發現, 對於函數 P, 能夠滿足定理 1 條件的正實數數列 $(a_1,a_2,\ldots,a_n)$, 條件『$\forall\ v_i\in V(G),\ \sum\limits_{v_k\in N^-(v_i)} a_k\cdot P(k,i)=a_i$』等價於滿足矩陣關係

式 $M\begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{bmatrix}$, 意即 $(a_1, a_2, \ldots, a_n)$ 必爲轉移矩陣 M 特徵值爲 1 的特徵向量。換句話說, 數列 $(a_1, a_2, \ldots, a_n)$ 必爲穩定狀態機率分布 S 的實數倍, 因此 $E(i) = \dfrac{\sum_{k=1}^{n} a_k}{a_i} = \dfrac{1}{p_i}$。定理 1 說明如果存在特殊的正實數數列, 則各點的期望值即可由此數列得知。然而 Perron-Frobenius Theorem 保證這個特殊的正實數數列的存在性, 在各項比例上亦具有唯一性, 由此可以知定理 2 是定理 1 的推論。特別的, 由建立聯立方程組並觀察係數, 定理 1 的充分條件即說明了, 當轉移矩陣 M 存在唯一恆正的穩定狀態機率分布時, 則各點的期望值即各機率的倒數。又因爲 G 爲強連通圖, 所以轉移矩陣 M 必爲不可分解, 故能保證 M 存在唯一恆正的穩定狀態機率分布, 這也突顯出定理 1 的充分條件事實上也會是必要條件, 而這樣的結果 Perron-Frobenius Theorem 居中扮演著重要的角色。

此外, 本文中的例 1 與例 2, 有關圖 G, 對於兩個不同的函數 P, 每個點 v_i 的期望值竟然皆可表示爲 $E(i) = \dfrac{|E(G)|}{d^+(v_i)}$。根據定理 2 可知, 其主要的原因是外度數數列 $(d^+(v_1), d^+(v_2), d^+(v_3), d^+(v_4), d^+(v_5))$ 爲兩個轉移矩陣的特徵值爲 1 的特徵向量。

陸、結語

本文一開始透過期望值之間的關係式, 建立聯立方程組, 藉由分析係數之間的關係, 用比較通俗的方法獲得定理 1, 獲得一個刻畫期望值的充分條件。然而轉移矩陣 M 不僅具有選邊機率的資訊, 更蘊含著圖的有向邊結構, 運用 Perron-Frobenius Theorem 即可得知強連通圖的轉移矩陣 M 必存在唯一的穩定狀態機率分布 $S > 0$, 從中獲得各點的期望值, 支撐定理 1 的充分條件是具有存在性的, 因而獲得定理 2, 進一步理解定理 1 的充分條件其實亦爲必要條件。隨機漫步的研究與應用非常地廣泛, 希望本文的呈現方式有助於高中生閱讀理解, 可以成爲學習隨機漫步的入門文章, 也可以作爲高中課堂上的補充教材。

最後要感謝國立中山大學應用數學系林晉宏教授, 在線性代數的知識上提供我們許多實質上的建議與指導。感謝審稿教授給予文章寫作上的提點, 方能讓此文章得以完整流暢地呈現。

參考資料

1. 張鎮華, 蔡牧村。演算法觀點的圖論。臺大出版中心, 2020。
2. 游森棚。森棚教官的數學題-向左轉向右轉。科學研習期刊, NO.61-04, 2022。
3. 林倉億。轉移矩陣二三事(3): 馬可夫鏈穩定狀態的判別。HPM 通訊第 17 卷, 2014。

4. A.E. Brouwer and W.H. Haemers, *Spectra of Graphs*, Springer, 2011.
5. S.H. Friedberg, A.J. Insel and L.E. Spence, *Linear Algebra*, 4th edition, Pearson Education, 2003.
6. R.A. Horn and C.R. Johnson, *Matrix Analysis*, Cambridge University Press, 1990.

—本文作者曹爾秦投稿時爲臺北市立第一女子高級中學高二學生, 楊宗穎任教於臺北市立第一女子高級中學—

勘誤表

第 49 卷 1 期, 第 50 頁 Line -4。

原爲：

$$M_p(a_1, \ldots, a_n) \geq M_p(a_1, \ldots, a_n) \text{ iff } p > q. \tag{4}$$

應爲：

$$M_p(a_1, \ldots, a_n) \geq M_q(a_1, \ldots, a_n) \text{ iff } p > q. \tag{4}$$

第 48 卷 2 期, 第 26 頁 Line 13。

原爲：總結 (相對論原理與光速恆定原理的相容性)

應爲：第五節 總結 (相對論原理與光速恆定原理的相容性)

第 40 卷 4 期, 第 35 頁 Line -13。

原爲：小於 300 的素勾股數有 47 個:

應爲：小於 300 的素勾股數有 47 組:

第 40 卷 4 期, 第 41 頁 Line -10。

原爲：證明顯示一直到 7824 這個數位爲止,

應爲：證明顯示一直到 7824 這個數爲止,

第 27 卷 3 期, 第 61 頁 Line -9。

原爲：即上題之 15 人分成三組, 各組有 5、5、4 人, 故沒有差別。

應爲：即上題之 14 人分成三組, 各組有 5、5、4 人, 故沒有差別。

第 27 卷 3 期, 第 61 頁 Line -7。

原爲：不妨先安排甲, 在安排乙。

應爲：不妨先安排甲, 再安排乙。